

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР

для специальности 1-31 04 01 Физика (по направлениям)
направления специальности 1-31 04 01-01
Физика (научно-исследовательская деятельность)

Введение. Краткий обзор основных принципов и этапов развития квантовой механики.

Основные понятия и приближения квантовой химии. Основные приближения теории: нерелятивистское приближение, адиабатическое приближение, орбитальное приближение. Понятие самосогласованного поля

Неэмпирические методы. Вывод уравнений Хартри-Фока-Рутана. Теория возмущений. Виды базисных функций Методы расчета молекулярных одно- и двух-электронных многоцентровых интегралов.

Методы учета электронной корреляции. Многодетерминантные волновые функции. Методы ограниченного и полного КВ. Расчет корреляционных эффектов в рамках теории возмущений.

Полуэмпирические методы. Метод МО ЛКАО и метод Хюккеля. Полуэмпирические методы полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием: CNDO, INDO, MNDO, AM1, PM3, ZINDO, ZINDO/S.

Теория функционала плотности. Основные теоремы теории функционала плотности (ТФП).

Краткое знакомство с методом молекулярной механики.

Изучение программных пакетов HyperChem, MOPAC, GAMESS. Ввод данных. Оптимизация геометрии, расчет энергетических и спектральных характеристик.

Перечень основной литературы

1. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979.
2. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.
3. Мак-Вини Р., Сатклиф Б., Квантовая механика молекул. М.: Мир, 1972.
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов на Дону: Феникс, 1997.
5. Цюлик П. Квантовая химия. М.: Мир, 1976.
6. Счастнев П.В. Теория электронных оболочек молекул. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1973.

Перечень дополнительной литературы

1. Cramer C.J., Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. Chichester: John Wiley & Sons, 2002.
2. Т. Кларк . Компьютерная химия . – М .: Мир, 1990.-382 с.
3. Сигал Дж . Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. М.: Мир, 1980, Т .1.-327 с., Т .2. – 371 с.